ЖЭТФ, 1997, том 112, вып. 4(10), стр. 1197–1208

ОБОБЩЕННЫЙ ЛОГАРИФМ БЕТЕ ДЛЯ СИЛЬНОСВЯЗАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

И. А. Гойденко, Л. Н. Лабзовский

Физический институт Санкт-Петербургского государственного университета
198904, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 1997 г.

Получено замкнутое релятивистское выражение, позволяющее рассчитать собственную энергию многозарядных ионов во внешнем кулоновском поле без разложения по αZ. Это выражение содержит обобщенный логарифм Бете для сильносвязанных электронов. Сделаны численные расчеты собственной энергии для $1s_{1/2}$-электронов водородоподобных многозарядных ионов. Предложенный метод позволяет рассчитывать собственную энергию для любых значений заряда ядра Z.

1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные достижения по измерению лэмбовского сдвига в многозарядных ионах [1–3] требуют повышения точности теоретических расчетов, в частности учета квантовоэлектродинамических поправок порядка α^2 (α — постоянная тонкой структуры). Такие расчеты предпринимались в последнее время различными группами [4–6]. Основная особенность этих расчетов — отсутствие разложения по αZ, где Z — заряд ядра.

К настоящему времени остаются невычисленными поправки к собственной энергии электрона во втором порядке. Общий подход к расчету таких поправок, включая перенормировку и устранение инфракрасных расходимостей, обсуждался в [7]. Однако пока ни один из конкретных методов, применявшихся к расчету собственной энергии в низшем порядке [8–10], не удавалось использовать для этой цели. В настоящей работе мы предлагаем еще один метод расчета, который, как нам представляется, наиболее естественно обобщается на второй порядок. Этот метод применяется к расчету собственной энергии в первом порядке и сравнивается с наиболее точными существующими методами расчета [11]. В отличие от всех предыдущих методов предлагаемый подход дает одинаково хорошую точность как при больших, так и при малых значениях Z. Другое отличие состоит в том, что мы предлагаем фактически замкнутое выражение для собственной энергии, содержащее обобщенный логарифм Бете [12].

Все теоретические расчеты сделаны в релятивистских единицах $m = \hbar = c = 1$, где m — масса электрона.

2. НЕРЕГУЛЯРИЗОВАННОЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ

Диаграмма Фейнмана, соответствующая неперенормированному выражению для собственной энергии, приведена на рисунке. Согласно классификации, приведенной

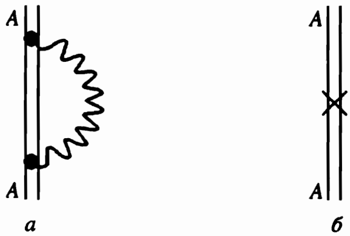

Диаграмма Фейнмана, соответствующая собственной энергии электрона в низшем порядке. Диаграмма *a* соответствует неперенормированной собственной энергии. Двойная сплошная линия изображает электрон в поле ядра, волнистая линия — фотон. Диаграмма *б* соответствует контрчлену, вычитаемому из вклада диаграммы *a*. Буквой A обозначено состояние электрона в атоме

в [13], эта диаграмма неприводимая, поэтому ее вклад в энергию можно записать как

$$\Delta E_A = \langle \Phi_A | U^n | \Phi_A \rangle, \tag{1}$$

где U^n — оператор эффективной потенциальной энергии в n-м порядке теории возмущений, определенный согласно [13]:

$$\langle \Phi_B | S^n | \Phi_A \rangle = -2\pi i \delta(E_A - E_B) \langle \Phi_B | U^n | \Phi_A \rangle. \tag{2}$$

Здесь S^n — оператор эволюции в n-ом порядке теории возмущений, а E_A и E_B — невозмущенные уровни энергии электрона во внешнем поле ядра.

Согласно правилам Фейнмана, для электрона во внешнем поле (картина Фарри) вклад диаграммы *a* записывается в виде

$$\langle \Phi_A | S^2 | \Phi_A \rangle = e^2 \int d^4x_1 d^4x_2 \left(\bar{\Psi}_A(x_2) \gamma_\mu S(x_2, x_1) \gamma_\nu \Psi_A(x_1) \right) D_{\mu\nu, ir}(x_1, x_2). \tag{3}$$

Здесь $S(x_1, x_2)$ — электронный пропагатор:

$$S(x_2, x_1) = \frac{1}{2\pi i} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left[i\omega(t_1 - t_2) \right] \sum_n \frac{\Psi_n(\mathbf{r}_2) \bar{\Psi}_n^-(\mathbf{r}_1)}{E_n(1 - i0) + \omega}, \tag{4}$$

$D_{\mu\nu}(x_1, x_2)$ — фотонный пропагатор:

$$D_{\mu\nu}(x_1, x_2) = \frac{4\pi}{i} \frac{\delta_{\mu\nu}}{(2\pi)^4} \int \exp\left[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega t \right] \frac{1}{\mathbf{k}^2 - \omega^2 - i0} d^3k d\omega, \tag{5}$$

где $\mathbf{k}$ и ω — волновой вектор и частота виртуального фотона.

Проинтегрировав в (3) по временам и частотам, получим выражение для нерегуляризованной собственной энергии электрона в низшем порядке:

$$\Delta E_A^{NR} = \frac{e^2}{2\pi i} \sum_n \left(\frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} I_{nA}(r_{12}) \right)_{AnnA}, \tag{6}$$

где $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, а также использовано обозначение

$$\left(\hat{A} \right)_{ABCD} = \int \left(\Psi_A^+(\mathbf{r}_1) \Psi_B^+(\mathbf{r}_2) \hat{A} \Psi_C(\mathbf{r}_1) \Psi_D(\mathbf{r}_2) \right) d^3x_1 d^3x_2. \tag{7}$$

Величина $I_{nA,ir}(r_{12})$ определяется интегралом

$$I_{nA}(r_{12}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\kappa \frac{\kappa \exp\left(i|\omega|r_{12}\right)}{(\omega - \kappa + i0)(\omega + \kappa - i0)\left[\beta_{nA} + \omega - i\,\mathrm{sign}(E_n)0\right]}, \tag{8}$$

где $\beta_{nA} = E_n - E_A$. Это выражение после интегрирования по ω и κ можно записать в виде

$$I_{nA}(r_{12}) = 2i\frac{|\beta_{nA}|}{\beta_{nA}}\left[\mathrm{ci}(|\beta_{nA}|r_{12})\sin(|\beta_{nA}|r_{12}) - \mathrm{si}(|\beta_{nA}|r_{12})\cos(|\beta_{nA}|r_{12})\right] + \\ + \frac{\pi i}{2}\left(1 + \frac{E_n}{|E_n|}\right)\left(1 - \frac{|\beta_{nA}|}{\beta_{nA}}\right)\exp\left(i|\beta_{nA}|r_{12}\right), \tag{9}$$

где si и ci — интегральные синус и косинус соответственно. Для положительной части дираковского спектра в нерелятивистском пределе $\beta_{nA} \sim (\alpha Z)^2$ и $r_{12} \sim (\alpha Z)^{-1}$. Поэтому разложение выражения (11) по $\beta_{nA}r_{12}$ соответствует разложению по αZ, хотя и не совпадает с ним (см. ниже). Учитывая, что в пределе $\alpha Z \ll 1$ выражение для собственной энергии электрона имеет порядок малости $v\alpha(\alpha Z)^4$ [12], мы должны предположить, что это разложение должно начинаться с $(\beta_{nA}r_{12})^3$. Однако первый член разложения содержит $(\beta_{nA}r_{12})^0$. Более того, это слагаемое дает расходящееся выражение:

$$\sum_n \left(\frac{1}{r_{12}}\right)_{AnnA} = \int d^3r_1 d^3r_2 \Psi_A^+(\mathbf{r}_1)\delta(r_{12})\frac{1}{r_{12}}\Psi_A(\mathbf{r}_2) = \infty, \tag{10}$$

что получается в силу полноты дираковского спектра. Эта расходимость, а также несоответствие разложения по αZ нерелятивистскому пределу исчезают при перенормировке.

3. ПЕРЕНОРМИРОВКА

Следуя [8], мы применяем перенормировку Паули–Вилларса. Для этого запишем фотонный пропагатор в виде

$$D_{\mu\nu}^{\Lambda}(x_1, x_2) = \frac{4\pi}{i}\frac{\delta_{\mu\nu}}{(2\pi)^4}\int \exp\left\{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)-\omega t\right\}\left[\frac{1}{\mathbf{k}^2-\omega^2-i0} - \frac{1}{\mathbf{k}^2-\omega^2+\Lambda^2-i0}\right] d^3k\,d\omega. \tag{11}$$

Теперь мы должны из диаграммы *а* вычесть диаграмму *б* (см. рисунок), которая в фейнмановской калибровке имеет вид

$$\delta m_A^{\Lambda} = \frac{e^2}{\pi}\left(\frac{3}{4}\ln\Lambda^2 + \frac{3}{8}\right)(\beta)_{AA}, \tag{12}$$

где β — дираковская матрица.

Подставляя (11) в (3), получаем вместо (6) ΔE_A^{Λ}, а для вычисления энергетического сдвига надо найти предел

$$\Delta E_A = \lim_{\Lambda\to\infty}(\Delta E_A^{\Lambda} - \delta m_A^{\Lambda}). \tag{13}$$

Выражение для ΔE_A^{Λ} по аналогии с (6) можно записать в виде

$$\Delta E_A^\Lambda = \frac{e^2}{2\pi i}\sum_n \left(\frac{1-\alpha_1\alpha_2}{r_{12}} I_{nA}^\Lambda(r_{12})\right)_{AnnA} \tag{14}$$

При вычислении (14) мы разбиваем I_{nA}^Λ на три слагаемых

$$I_{nA}^{\Lambda 1} = -2i\frac{E_n}{|E_n|}\Lambda^2 \int\limits_0^\infty \frac{\kappa \sin(\kappa r_{12}) d\kappa}{(\kappa^2-\beta_{nA}^2)(\kappa^2-\beta_{nA}^2+\Lambda^2)}, \tag{15}$$

$$I_{nA}^{\Lambda 2} = 2i\beta_{nA}\int\limits_0^\infty \frac{\sin(\kappa r_{12})d\kappa}{\beta_{nA}^2-\kappa^2} =$$

$$= 2i\frac{\beta_{nA}}{|\beta_{nA}|}\left\{\sin(|\beta_{nA}|r_{12})\,\mathrm{ci}(|\beta_{nA}|r_{12}) - \cos(|\beta_{nA}|r_{12})\left[\mathrm{si}(|\beta_{nA}|r_{12})+\frac{\pi}{2}\right]\right\}, \tag{16}$$

$$I_{nA}^{\Lambda 3} = -2i\beta_{nA}\int\limits_0^\infty \frac{\kappa\sin(\kappa r_{12})d\kappa}{(\beta_{nA}^2-\kappa^2-\Lambda^2)\sqrt{\kappa^2+\Lambda^2}}. \tag{17}$$

Выражение (16) есть аналог $I_{nA}(r_{12})$, правда, без слагаемого, содержащего расходимость (12). Вклад (15) в выражение (14) равен нулю, поэтому далее переходим к вычислению $I_{nA}^{\Lambda 3}$.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ $I_{nA}^{\Lambda 3}$

Вначале предположим, что в выражении (17)

$$\frac{\beta_{nA}^2}{\kappa^2+\Lambda^2} < 1$$

для любых β_{nA}. Это означает, что для любого состояния дираковского спектра можно найти такое значение Λ, что $|\beta_{nA}| < \Lambda$. Тогда подынтегральное выражение в (17) можно разложить в ряд:

$$\frac{\kappa\sin(\kappa r_{12})}{(\beta_{nA}^2-\kappa^2-\Lambda^2)\sqrt{\kappa^2+\Lambda^2}} = \sum_{k=0}^\infty \frac{\kappa\sin(\kappa r_{12})}{\sqrt{\kappa^2+\Lambda^2}}\left(\frac{\beta_{nA}}{\kappa^2+\Lambda^2}\right)^{2k}. \tag{18}$$

Используя равенство

$$\int\limits_0^\infty \frac{\kappa\sin(\kappa r_{12})d\kappa}{(\kappa^2+\Lambda^2)^\gamma} = \frac{(-\gamma+1)r_{12}}{2}\int\limits_0^\infty \frac{\kappa\cos(\kappa r_{12})d\kappa}{(\kappa^2+\Lambda^2)^{\gamma-1}} \tag{19}$$

и сопоставляя (17), (18) и (19), находим

$$I_{nA}^{\Lambda 3}(r_{12}) = -2i\sum_{k=0}^\infty \beta_{nA}^{2k+1}\frac{r_{12}}{2k+1}\int\limits_0^\infty \frac{\cos(\kappa r_{12})d\kappa}{(\kappa^2+\Lambda^2)^{k+1/2}} =$$

$$= -2i\sum_{k=0}^\infty \beta_{nA}^{2k+1}\frac{r_{12}}{2k+1}\frac{\sqrt{\pi}}{(2\Lambda)^k}\frac{1}{\Gamma(k+1/2)}r_{12}^k K_k(\Lambda r_{12}), \tag{20}$$

где $K_\kappa(x)$ — функция Бесселя мнимого аргумента. Раскладывая эту функцию в ряд Тейлора, получаем

$$I_{nA}^{\Lambda 3}(r_{12}) = -4i \sum_{k=0}^{\infty} \beta_{nA}^{2k+1} \frac{r_{12}}{2k+1} \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(k+1/2)} \left(\frac{r_{12}}{2\Lambda}\right)^k \left\{ \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{k-1} (-1)^m \frac{(k-m-1)!}{m!(\Lambda r_{12}/2)^{k-2m}} + \right.$$
$$\left. + (-1)^{k+1} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\Lambda r_{12}/2)^{k+2m}}{m!(k+m)!} \left[\ln\frac{\Lambda r_{12}}{2} - \frac{1}{2}\psi(m+1) + \frac{1}{2}\psi(m+k+1) \right] \right\}, \tag{21}$$

где

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln\Gamma(x).$$

Прежде чем мы подставим (21) в (14), необходимо сделать отступление, объясняющее дальнейшие преобразования.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ МНОГОКРАТНЫХ КОММУТАТОРОВ

Входящие в (21) разности энергий β_{nA} могут быть представлены при подстановке в (14) в виде коммутаторов. В самом деле,

$$(\beta_{nA}\hat{O})_{AnnA} = ([\hat{h}_2, \hat{O}])_{AnnA} = -([\hat{h}_1, \hat{O}])_{AnnA}, \tag{22}$$

где $\hat{O}$ — произвольный оператор, а $\hat{h}_i$ — дираковский гамильтониан в i-координатном пространстве:

$$\hat{h}_i = \boldsymbol{\alpha}_i \hat{p}_i + \beta m - eU(r_i). \tag{23}$$

Здесь β — матрица Дирака, $eU(r)$ — потенциальная энергия, $\mathbf{p}_i = -i\boldsymbol{\nabla}_i$.

С помощью формулы (22) в выражениях, содержащих β_{nA} в любой степени, можно делать замену на многократные коммутаторы. Например, совершая замену β_{nA} на коммутатор с $\hat{h}_2$, можно получить

$$\left(\beta_{nA}^k \hat{O}\right)_{AnnA} = \left([\hat{h}_2, [\hat{h}_2, \ldots [\hat{h}_2, \hat{O}] \ldots]^k\right)_{AnnA}, \tag{24}$$

где $[\ldots]^k$ означает k-кратное применение коммутаторов. Заметим, что то же самое можно сделать и в пространстве $\mathbf{x}_1$, но тогда в конечном выражении появится множитель $(-1)^k$.

Отметим, что оператор импульса, входящий в многокоммутаторное выражение (24), понижает степень r_{12}. Рассмотрим выражение

$$F = \sum_n ([\hat{h}_2[\hat{h}_2 \ldots [\hat{h}_2, (1 - \boldsymbol{\alpha}_1\, \boldsymbol{\alpha}_2) r_{12}^{2k}] \ldots]^l)_{AnnA}. \tag{25}$$

Используя свойство полноты дираковского спектра

$$\sum_n \Psi_{n\alpha}^+(\mathbf{r}_1)\Psi_{n\gamma}(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\delta_{\alpha\gamma}, \tag{26}$$

(α и γ — спинорные индексы), (25) можно записать в виде

$$F = \int d^3r_1 d^3r_2 \Psi_A^+(\mathbf{r}_1)\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\{ [\hat{h}_2[\hat{h}_2[\ldots[\hat{h}_2, r_{12}^{2k}]\ldots]^l - \\ - \delta_{12}\boldsymbol{\alpha}_1[\hat{h}_2[\hat{h}_2[\ldots[\hat{h}_2, \boldsymbol{\alpha}_2 r_{12}^{2k}]\ldots]^l\}\Psi_A(\mathbf{r}_2). \tag{27}$$

В последнем выражении символ Кронекера δ_{12} относится к α-матрицам Дирака. Выражение (27) не равно тождественно нулю только при $l \geq 2k$. Действительно, если в (27) после раскрытия всех коммутаторов остается r_{12} в степени больше чем нуль, то $F = 0$. Эти простые соображения позволяют оставить в (21) только слагаемые, в которых $m = 2k + 1$.

6. ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ И ПРАВИЛО СУММ

Упрощая (21) согласно правилам, сформулированным в предыдущем разделе, и подставляя (21) вместе с (16) в (14), получаем выражение, очень похожее на (6), но не содержащее расходимостей и имеющее правильный порядок по αZ в нерелятивистском пределе:

$$\Delta E_A = \frac{e^2}{\pi}\lim_{\Lambda\to\infty}\left\{\sum_n\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}[\psi(k+1)-\psi(k)]\sum_n \beta_{nA}^{2k+1}\left([1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2]r_{12}^{2k}\right)_{AnnA} + \right. \\ + 2\left(\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}}\left[\sin(\beta_{nA}r_{12})\,\mathrm{ci}(\beta_{nA}r_{12}) - \cos(\beta_{nA}r_{12})\left(\mathrm{si}(\beta_{nA}r_{12}) + \frac{\pi}{2}\right)\right]\right)_{AnnA} - \\ \left. - 2\sum_n\left(\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}}\sin(\beta_{nA}r_{12})\ln\frac{\Lambda r_{12}}{2}\right)_{AnnA} - \left(\frac{3}{4}\ln\Lambda^2 + \frac{3}{8}\right)(\beta)_{AA}\right\}. \tag{28}$$

Из условия конечности ΔE_A следует

$$\sum_n\left(\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}}\sin(\beta_{nA}r_{12})\right)_{AnnA} = -\frac{3}{4}(\beta)_{AA}. \tag{29}$$

Равенство (29) мы называем в дальнейшем правилом сумм, поскольку оно является аналогом нерелятивистских правил сумм для вероятностей перехода. Заметим, что правая часть (29) похожа на формулу для ширины уровня A [13]:

$$\mathrm{Im}(\Delta E_A) = -\frac{\Gamma_A}{2} = \frac{e^2}{\pi}\sum_n\left(\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}}\sin(\beta_{nA}r_{12})\right)_{AnnA}, \tag{30}$$

$$0 < E_n < E_A.$$

Нам не удалось найти явного аналитического доказательства правила сумм (29). В Приложении дается прямое численное доказательство этого правила для $Z = 1$ и $A = 1s_{1/2}$. В следующем разделе дано неявное доказательство правила (29) для $A = 1s_{1/2}$ и произвольных значений Z.

Приняв правило сумм (29), получим выражение для собственной энергии:

$$\Delta E_A = \frac{e^2}{\pi}\left\{2\sum_n \left(\frac{1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}}\left[\sin(\beta_{nA}r_{12})\left(\ln\frac{1}{2|\beta_{nA}|}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+1}(\beta_{nA}r_{12})^{2k}}{2k(2k)!}\right) - \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. - \cos(\beta_{nA}r_{12})\left(\mathrm{si}(\beta_{nA}r_{12})+\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k(\beta_{nA}r_{12})^{2k+1}}{(2k+1)!}\sum_{p=1}^{k}\frac{1}{p}\right]\right)_{AnnA} - \frac{3}{8}(\beta)_{AA}\right\}, \quad (31)$$

где ψ-функции записаны в явном виде.

Нерелятивистское выражение для вклада собственной энергии электрона в лэмбовский сдвиг для $A = ns_{1/2}$ имеет вид [12]

$$\Delta E_A^{NR} = \frac{2\alpha}{3\pi}\sum_{m_{Sh}}\left(r_{12}^2\beta_{nA}^3\ln\frac{1}{2|\beta_{nA}|}\right)_{AnnA} + \frac{e^3}{3\pi m^2}\frac{5}{6}\langle A|\Delta U|A\rangle + \frac{e}{4\pi m^2}\langle A|\boldsymbol{\sigma}\mathbf{l}\frac{1}{r}\frac{dU}{dr}|A\rangle, \quad (32)$$

где суммирование ведется по шредингеровскому спектру, $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули, $\mathbf{l}$ — оператор углового момента. Первый член (32) представляет собой так называемый логарифм Бете.

Первое слагаемое в (31) в нерелятивистском пределе $\beta_{nA}r_{12} \ll 1$ переходит в логарифм Бете. Отметим, что разложение по $\beta_{nA}r_{12}$ на самом деле отнюдь не совпадает с разложением по αZ, что не дает возможности получить аналитически члены в (32) предельным переходом из (31). Такой переход проделан численно в следующем разделе.

7. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ СОБСТВЕННОЙ ЭНЕРГИИ И ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ПРАВИЛА СУММ

Выражение (31) может быть представленно в виде

$$\Delta E_A = \sum_{k=0}^{\infty}(\alpha_k X_k + \gamma_k Y_k) - \frac{3e^2}{8\pi}(\beta)_{AA}, \quad (33)$$

где

$$X_k = \frac{2e^2}{\pi}\sum_n \left(\beta_{nA}^{2k+1}(1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2)r_{12}^{2k}\right)_{AnnA}, \quad (34)$$

$$Y_k = \frac{2e^2}{\pi}\sum_n \left(\beta_{nA}^{2k+1}\ln\frac{1}{2|\beta_{nA}|}(1-\boldsymbol{\alpha}_1\boldsymbol{\alpha}_2)r_{12}^{2k}\right)_{AnnA}, \quad (35)$$

а α_k и γ_k — численные коэффициенты:

$$\alpha_k = \sum_{p=0}^{k}\frac{(-1)^p}{(2p)!}\frac{(-1)^{k-p}}{(2k-2p+1)(2k-2p+1)!} +$$
$$+\sum_{p=0}^{k-1}\frac{(-1)^{p+1}}{(2p+1)!}\frac{(-1)^{k-p-1}}{(2k-2p)(2k-2p)!} - \frac{1}{2}\frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\sum_{p=1}^{k}\frac{1}{p}, \quad (36)$$

Таблица 1

Численные значения ΔE_A

Z	k	$-X_k$, Ry	$-Y_k$, Ry	$\tilde{\alpha}_k$	$\tilde{\gamma}_k$	ΔE_A, Ry	
						Наст. работа	[11]
92	0	125.424	229.825	1.50000	1.00000	417.9614	–
	1	303.501	514.988	−0.805556	−0.166667	87.64321	–
	2	474.773	781.293	0.121111	$8.33 \cdot 10^{-3}$	151.6543	–
	3	14286.5	23335.9	$-8.69 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-4}$	22.74613	–
	4	12379.0	23761.4	$3.62 \cdot 10^{-4}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$	27.29876	–
	5	18024.7	28277.2	$-1.05 \cdot 10^{-5}$	$-2.51 \cdot 10^{-8}$	27.10789	27.1072
80	0	86.5663	171.607	1.50000	1.00000	301.4567	–
	1	218.195	381.149	−0.805556	−0.166667	62.16344	–
	2	391.798	701.758	0.121111	$8.33 \cdot 10^{-3}$	115.4626	–
	3	11389.0	19947.5	$-8.69 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-4}$	12.43219	–
	4	7844.25	15669.4	$3.62 \cdot 10^{-4}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$	15.31876	–
	5	8322.33	15750.7	$-1.05 \cdot 10^{-5}$	$-2.51 \cdot 10^{-8}$	15.23057	15.2315
70	0	46.3909	71.8354	1.50000	1.00000	141.4217	–
	1	100.495	184.462	−0.805556	−0.166667	29.72343	–
	2	140.618	241.298	0.121111	$8.33 \cdot 10^{-3}$	48.76462	–
	3	4542.50	7539.25	$-8.69 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-4}$	7.753638	–
	4	4428.04	8238.59	$3.62 \cdot 10^{-4}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$	9.381425	–
	5	6842.79	10995.1	$-1.05 \cdot 10^{-5}$	$-2.51 \cdot 10^{-8}$	9.308960	9.3104
10	0	$3.19 \cdot 10^{-2}$	$5.363 \cdot 10^{-2}$	1.50000	1.00000	0.1014567	–
	1	$7.43 \cdot 10^{-2}$	0.122431	−0.805556	−0.166667	$2.1163 \cdot 10^{-2}$	–
	2	0.103819	0.207066	0.121111	$8.33 \cdot 10^{-3}$	$3.5462 \cdot 10^{-2}$	–
	3	3.44458	5.37324	$-8.69 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-4}$	$4.4321 \cdot 10^{-3}$	–
	4	3.77247	6.94294	$3.62 \cdot 10^{-4}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$	$5.8187 \cdot 10^{-3}$	–
	5	4.60871	6.92177	$-1.05 \cdot 10^{-5}$	$-2.51 \cdot 10^{-8}$	$5.7699 \cdot 10^{-3}$	$5.775 \cdot 10^{-3}$
1	0	$8.54 \cdot 10^{-6}$	$1.693 \cdot 10^{-5}$	1.50000	1.00000	$2.9745 \cdot 10^{-5}$	–
	1	$2.17 \cdot 10^{-5}$	$3.795 \cdot 10^{-5}$	−0.805556	−0.166667	$5.9163 \cdot 10^{-6}$	–
	2	$2.81 \cdot 10^{-5}$	$5.042 \cdot 10^{-5}$	0.121111	$8.33 \cdot 10^{-3}$	$9.7462 \cdot 10^{-6}$	–
	3	$9.76 \cdot 10^{-4}$	$1.711 \cdot 10^{-3}$	$-8.69 \cdot 10^{-3}$	$-1.98 \cdot 10^{-4}$	$9.1032 \cdot 10^{-7}$	–
	4	$1.03 \cdot 10^{-3}$	$2.060 \cdot 10^{-3}$	$3.62 \cdot 10^{-4}$	$2.76 \cdot 10^{-6}$	$1.2898 \cdot 10^{-6}$	–
	5	$1.37 \cdot 10^{-3}$	$2.592 \cdot 10^{-3}$	$-1.05 \cdot 10^{-5}$	$-2.51 \cdot 10^{-8}$	$1.2753 \cdot 10^{-6}$	$1.297 \cdot 10^{-6}$

$$\gamma_k = \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}. \tag{37}$$

Последнее слагаемое из выражения (33) может быть переписано с учетом правила сумм и после разложения синуса в ряд Тейлора подобно первому. Значение коэффициентов γ_k при этом останется прежним, а α_k изменятся:

$$\Delta E_A = \sum_{k=0}^{\infty} (\tilde{\alpha}_k X_k + \tilde{\gamma}_k Y_k), \tag{38}$$

где

$$\tilde{\alpha}_k = \alpha_k + \frac{1}{2} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}, \tag{39}$$

$$\tilde{\gamma}_k = \gamma_k. \tag{40}$$

В табл. 1 приведены значения коэффициентов $\tilde{\alpha}_k$ и $\tilde{\gamma}_k$ вместе со значениями X_k и Y_k, рассчитанными по формулам (34) и (35) для состояния $A = 1s_{1/2}$ при различных значениях заряда ядра Z при помощи B-сплайнов [14, 15]. Сплайны использовались для приближенного расчета сумм по дираковскому спектру. В последней колонке приведены значения собственной энергии, взятые из [11]. Из данной таблицы видно, что новый метод расчета собственной энергии одинаково хорош при любых значениях Z.

В заключение отметим, что хорошее совпадение наших значений собственной энергии с полученными ранее служит неявным доказательством правила сумм. Поскольку для Z=1 значение последнего слагаемого в (33) на 5 порядков больше величины собственной энергии, а совпадение результатов составляет два знака, правило сумм проверено с точностью до семи значащих цифр. Аналогично и для $Z = 92$: $(\beta)_{AA}$ больше собственной энергии на два порядка, а из табл. 1 получаем четыре значащих цифры, что подтверждает правило сумм с точностью до шести знаков.

Авторы благодарны А. В. Нефедову, А. О. Митрущенкову, Ю. Ю. Дмитриеву, Т. А. Федоровой, Г. Зоффу, Х. Персону, И. Линдгрену, П. Мору и У. Янчуре за многочисленные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 96-02-17167).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Численное доказательство правила сумм

Здесь мы приводим доказательство формулы (29), полученное для $Z = 1$ и $A = 1s_{1/2}$, сделанное численно с использованием B-сплайнов [14, 15].

Вначале проведем интегрирование по углам в левой части выражения (29), а затем представляем в виде

$$S_A \equiv \sum_n \left(\frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} \sin(\beta_{nA} r_{12}) \right)_{AnnA} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=l\pm\frac{1}{2}} S_A^{(lj)}. \tag{П.1}$$

Далее рассмотрим состояние $A = 1s_{1/2}$ для атома водорода. В этом случае $(\beta)_{AA} \approx$ ≈ 1.000. Результаты расчетов для $l = 0, \ldots, 4$ приведены в табл. 2.

Как видно из таблицы, сходимость S_A по l достаточно плохая. Поэтому была сделана асимптотическая оценка ряда (П.1) для $l > 4$. Для этого мы вначале проинтегрировали в (29) по угловым переменным левую часть выражения и получили

Таблица 2

Численное доказательство правила сумм

l	j	$S_A^{(lj)}$	$\sum_{l'}^{l} S_A^{(l'j)}$	$\frac{1}{(\beta)_{AA}}\sum_{l'}^{l}\sum_{j} S_A^{(l'j)}$
0	1/2	−0.607	−0.607	−0.607
1	1/2	0.045		
1	3/2	−0.135	−0.697	−0.697
2	3/2	0.017		
2	5/2	−0.048	−0.728	−0.728
3	5/2	0.007		
3	7/2	−0.015	−0.736	−0.736
4	7/2	0.001		
4	9/2	−0.001	−0.736	−0.736
$l \geq 5$		−0.014	−0.750	−0.750

$$\mathrm{Re}\left[\sum_{n,\kappa} F(\kappa,\kappa_A)\sum_{l=0}^{\infty}\int_0^{\infty} dr_1 \int_0^{\infty} dr_2 F_l \theta_l(r_1,r_2,\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A})[f_{n_A\kappa_A}(r_1)f_{n\kappa}(r_1)+\right.$$
$$+g_{n_A\kappa_A}(r_1)g_{n\kappa}(r_1)]\left[f_{n_A\kappa_A}(r_2)f_{n\kappa}(r_2)+g_{n_A\kappa_A}(r_2)g_{n\kappa}(r_2)\right]+\theta_{l\pm1}(r_1,r_2,\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A})\times$$
$$\times\left[F_{l_1}g_{n_A\kappa_A}(r_1)f_{n\kappa}(r_1)+F_{l_2}f_{n_A\kappa_A}(r_1)g_{n\kappa}(r_1)\right]\times$$
$$\left.\times\left[F_{l_3}g_{n_A\kappa_A}(r_2)f_{n\kappa}(r_2)+F_{l_4}f_{n_A\kappa_A}(r_2)g_{n\kappa}(r_2)\right]\right], \qquad (\text{П.2})$$

где $F, F_l, F_{l_1}, \ldots, F_{l_4}$ — численные коэффициенты (некоторые из них приведены ниже), $f_{n\kappa}(r), g_{n\kappa}(r)$ — большая и малая радиальные компоненты релятивистских волновых функций $|n,\kappa\rangle$, $\kappa = \pm(j+1/2)$ и n — главное квантовое число. Функции θ_l имеют вид

$$\theta_l(r_1,r_2,\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A}) = \begin{cases} j_l(\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A}cr_1)h_l^{(1)}(\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A}cr_2), & r_1<r_2,\\ j_l(\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A}cr_2)h_l^{(1)}(\beta_{n\kappa,n_A\kappa_A}cr_1), & r_1>r_2,\end{cases} \qquad (\text{П.3})$$

где $j_l(z)$ и $h_l^{(1)}(z)$ — сферические функции Бесселя первого и второго родов соответственно. Все дальнейшие расчеты делались в атомной системе единиц ($\hbar = e = m = 1$), c — скорость света. Для $l \gg 1$ и $Z \sim 1$ сферические функции Бесселя имеют асимптотический вид:

$$j_l \sim \left(\frac{eZ}{2l}\right)^l\left[1+O\left(\frac{1}{l}\right)\right], \quad h_l^{(1)}(z) = j_{-l}(z).$$

При $Z = 1$ существенна только компонента $f_{n_A\kappa_A}(r)$. Поэтому в выражении (П.2) для нас важны только коэффициенты F, F_l, F_{l_1} и F_{l_3}. Для $l_n \gg 1$

$$F \approx \sqrt{\frac{2}{2|\kappa|+1}}, \quad F_l \approx \frac{(-1)^{j_n}\beta_{nA}}{4j_n+2}, \quad F_{l_1} \approx \frac{(-1)^{l_n}}{2|\kappa|+1}, \quad F_{l_3} \approx \frac{(-1)^{l_n}}{2|\kappa|+3}.$$

Суммирование по дискретной и сплошной частям дираковского спектра было рассмотрено отдельно. Для дискретного спектра радиальные компоненты волновых функций имеют вид [12] ($\alpha Z \ll 1$)

$$\frac{1}{r} f_{n\kappa}(r) \approx \frac{(2\lambda_\kappa)^{3/2+|\kappa|}}{(2|\kappa|)!} \sqrt{\frac{(n+|\kappa|)!(n+|\kappa|)}{2n(n-|\kappa|)!}} r^{|\kappa|} \exp(-\lambda_\kappa r) \frac{|\kappa| + 2n_r - \kappa}{2|\kappa| + n_r},$$

$$\frac{1}{r} g_{n\kappa}(r) \approx 0,$$

где $\lambda_\kappa \approx Z/|\kappa| \ll 1$ и n_r — радиальное квантовое число. После этого (П.2) можно проинтегрировать по r_1 и r_2 и получить сходящийся ряд по n и l, который суммируется явно и дает

$$\sum_n \sum_{l=5}^{\infty} \left(\frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} I_{nA}^{\Lambda 1}(r_{12}) \right)_{AnnA} \approx 3.882 \cdot 10^{-2} \text{ ат.ед.}$$

Аналогично были проведены расчеты для обеих частей непрерывного спектра. Для них, согласно [12], $g_{E_-}(r) \simeq f_{E_+}(r)$ и для E_+

$$\frac{1}{r} \left[f_{E\kappa}(r) \right] \simeq 2^{3/2} \sqrt{\frac{mc^2 + E}{E}} \exp\left(\pi \frac{\nu}{2} \right) \frac{|\Gamma(|\kappa| + i\nu)|}{\Gamma(2|\kappa|)} \times$$
$$\times (2pr)^{|\kappa|} \operatorname{Re} \left\{ \exp\left[i(pr + \xi) \right] F(|\kappa| - i\nu; 2|\kappa|; -2ipr) \right\},$$

где

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E^2 - (mc^2)^2}, \quad \nu = \frac{Z\alpha E}{p},$$

$$\exp(-i\xi) = \sqrt{\frac{|\kappa| - i\nu}{\kappa - imc^2\nu/E}} \approx \begin{cases} \kappa - (i\nu/2)(mc^2/E - 1), & \kappa > 0, \\ i\kappa + (\nu/2)(mc^2/E + 1), & \kappa < 0. \end{cases}$$

Для положительной части непрерывного спектра остается выражение с коэффициентом F_{l_1}, а для отрицательной — с коэффициентом F_{l_3}. После интегрирования по r_1 и r_2 в (П.2) получается опять сходящийся ряд по n и l, который снова суммируется явно и дает

$$\sum_n \sum_{l=5}^{\infty} \left(\frac{1 - \boldsymbol{\alpha}_1 \boldsymbol{\alpha}_2}{r_{12}} I_{nA}^{\Lambda 1}(r_{12}) \right)_{AnnA} \approx -5.317 \cdot 10^{-2} \text{ ат.ед.}$$

Часть работы выполнена во время пребывания одного из авторов (И. А. Г.) в Техническом университете Дрездена по программе «REHE».

Литература

1. J. Schweppe, A. Belkasem, L. Blumenfeld et al., Phys. Rev. Lett. **66**, 1434 (1991).
2. Th. Stöhlker, P. H. Mokler, K. Beckert et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 2184 (1993).
3. H. F. Beyer, G. Menzel, D. Liesen et al., Z. Phys. D **35**, 169 (1995).
4. T. Beier and G. Soff, Z. Phys. D **8**, 129 (1988); S. M. Schneider, W. Greiner, and G. Soff, J. Phis. B **26**, L529 (1993).
5. I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson et al., J. Phys. B **26**, L503 (1993).
6. A. Mitrushenkov, L. Labzowsky, I. Lindgren, H. Persson, and S. Salomonson, Phys. Lett. A **200**, 51 (1995).
7. L. N. Labzowsky and A. O. Mitrushenkov, Phys. Rev. A **53**, 3029 (1996).
8. P. J. Mohr, Ann. Phys. (NY) **38**, 26 (1974).
9. S. A. Blundell and N. L. Snyderman, Phys. Rev. A **44**, R1427 (1991).
10. I. Lindgren, H. Persson, S. Salomonson, and A. Ynnerman, Phys. Rev. A **47**, R4555 (1993).
11. P. J. Mohr, Phys. Rev. A **46**, 4421 (1992).
12. Г. Бете, Э. Солпитер *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
13. Л. Н. Лабзовский, в сб. *Вопросы квантовой теории атомов и молекул*, ЛГУ, Ленинград (1978), вып. 1, с. 52; L. Labzowsky, G. Klimchitskaja, and Yu. Dmitriev, *Relativistic effects in the spectra of atomic systems*, IOP Publ., Bristol (1993).
14. W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein, Phys. Rev. A **37**, 307 (1988).
15. K. де Бор, *Практическое руководство по сплайнам*, Радио и связь, Москва (1984).